

# DSMC molekül hücre bilgisi için genelleştirilmiş koordinat kullanılması

Nevsan ŞENGİL\*, Fırat Oğuz EDİS

İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Uzay Mühendisliği Programı, 34469, Ayazağa, İstanbul

## Özet

*Doğrudan Benzetim Monte Carlo (DSMC) seyreltik ve mikro boyutlu gaz akışlarını çözümlemek için kullanılan molekül esaslı bir yöntemdir. DSMC hesaplama süresi olarak pahalı bir yöntem olduğundan genelde Euler ve Navier-Stokes gibi geleneksel sürekli ortam denklemlerinin kullanılmasının uygun olmadığı durumlarda kullanılmaktadır. Ortamın geleneksel sürekli ortam denklemlerine uygun olup olmadığına ise boyutsuz Knudsen sayısına ( $Kn$ ) bakılarak karar verilmektedir. Knudsen sayısı yükseldikçe önce sınırlarda hız kayması ve sıcaklık atlaması oluşur. Takiben ısı akı vektörünün sıcaklık gradyeni, gerilme tensörünün ise gaz akış hız gradyeni ile olan doğrusal ilişkisi sona erer. Bu şartlar oluştuğunda hesaplamalar için deneylere uygun sonuçlar veren DSMC yöntemine ihtiyaç duyulmaktadır. DSMC yönteminde DSMC molekülleri her bir zaman adımında sahip oldukları hız nedeni ile konum değiştirirler. Bu konum değişikliği nedeni ile içinde yer aldıkları hücrelerde değişebilmektedirler. DSMC molekül çarpışmaları ve makro değer hesaplamaları hücre temelinde modellendiğinden her zaman adımı sonunda DSMC moleküllerinin yeniden konuşlandıkları hücrelere ait bilgilerin güncellenmesine ihtiyaç vardır. Geleneksel DSMC yönteminde moleküller hücreden hücreye takip edilerek son gittikleri hücre bilgisine ulaşılır. Eğer gaz akış bölgesi dikdörtgen bir geometriye dönüştürülebilir ise DSMC molekülünün gittiği son hücre yapısal ağ bilgisinden yararlanılarak basit bir aritmetik işlem ile bulunabilmektedir. Bu çalışmada DSMC hesaplama verimliliğini arttırmak için mikro ölçekli yakınsak-ıraksak bir soğuk gaz lülesi için koordinat dönüşümü ile kare şeklinde bir hesaplama bölgesi oluşturulmuş ve hücre bilgisi hesaplama süresi kısaltılmıştır. İlaveten her zaman adımı sonunda moleküllerin yeniden hücre numarasına göre sıraya dizilmesi işlemine olan ihtiyaca yeni bir yaklaşımla son verilmiştir.*

**Anahtar Kelimeler:** DSMC, mikro gaz akışları, mikro-lüle, genelleştirilmiş koordinatlar.

\*Yazışmaların yapılacağı yazar: Nevsan ŞENGİL. [sengiln@itu.edu.tr](mailto:sengiln@itu.edu.tr); Tel: (212) 285 31 13.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Uzay Mühendisliği Programı'nda tamamlanmış olan "Mikro gaz akışlarının DSMC (Doğrudan Benzetim Monte Carlo) yöntemi ile çözümlenmesi" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 14.11.2008 tarihinde dergiye ulaşmış, 27.11.2008 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 31.01.2011 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

## Analysis of micro gas flows with DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) method

### Extended abstract

*In the last 25 years a number of Micro Electro Mechanical System (MEMS) were developed. These MEMS devices not only include the mechanical systems but also the fluids. Knowledge about fluid flows in this scale is not as mature as the mechanical properties of the MEMS. As their dimensions are between 1 mm and 1 micron, gas flows related with the MEMS devices have high Knudsen numbers (Kn) similar to high atmosphere flights. If Kn is higher than 0.1, instead of the classical continuum based Euler or Navier-Stokes (N-S) equations, higher order continuum based equations like Burnett equations or molecular models like DSMC should be used. This is due to the departure from local thermodynamic equilibrium with increasing Kn number. First velocity slip and temperature jump are formed on the boundaries. Next, low order constitutive equations are lost their validity because relations both between shear stress and velocity gradient and heat conduction and temperature gradient are not linear any more. Additionally the ratio of flow surface area to flow volume is dramatically increased in micro gas flow conditions. So surface forces dominate the volume forces. Consequently, compressibility and viscous heating (dissipation) effects become more important in micro gas flows in addition to rarefaction effects. Even in low Mach numbers, large density and temperature gradients prevail. It is found that a micro scale gas flow can behave differently from the large-scale one, which is generally studied with hydrodynamic models.*

*Our application of DSMC starts with the division of the computational domain into smaller cells. Linear dimensions of these cells are of the same order as the mean-free-path ( $\lambda$ ) of the gas. A group of physical gas molecules are represented by one representative molecule that called DSMC molecule in this study. Every DSMC molecule carries position, velocity, cell number and if applicable internal energy information on it. In DSMC method molecule movements and collisions are separated from each other. As a first step, molecules move according to their velocities and initial conditions. Their velocities, positions and cell numbers are updated. In the collision step, stochastic approach is used and mo-*

*lecule velocities are updated according to the collision model chosen. Next step is the calculation of the macroscopic gas flow properties for each cell from the microscopic molecule information. For steady flows, time averaging is used for the calculation of macroscopic properties.*

*DSMC method is computationally expensive. To shorten the computation time new approaches are needed.. Generally molecule movements are traced cell-by-cell in DSMC solvers both in structural and unstructured meshes. At each time step DSMC molecules move to a new position. Then each DSMC molecule is checked whether they left the cell or not. If it is determined that DSMC molecules left the cell then which cell they stopped is calculated. To do this either all the neighbor cells should be searched or which edge molecule left the origin cell should be determined. And then new cell is found. This procedure requires many mathematical calculations and time. If non-rectangular physical flow geometry can be converted a rectangular computational domain, then it is possible to calculate the DSMC molecule cell information in a very short time with a very simple mathematical operation. Additionally current DSMC solvers use complex and time consuming indexing mechanism to realize molecule collisions. All the molecules put in order 1-Dimensional arrays at the end of each time step. Molecule collision partners are selected from this array, which are required to be in the same cell. In this study using a new data structure which consist of a cell number and a molecule number in that cell. Each molecule completing its movement is renumbered according to its new cell information and what number in this cell. This new data structure is copied onto old data structure at the end of each time step. Consequently complex indexing mechanism is found to be obsolete now. A cold gas micro-nozzle test problem is chosen from the literature. In this problem working medium is Argon. A test study is performed with Argon gas flow through a convergent-divergent micro-nozzle to determine the efficiency of the new method. Both macro properties of Argon gas flow through the micro-nozzle and solution times of each method is reported. Cold gas flow through a micro-nozzle is chosen because they are thought important for micro-propulsion systems.*

**Keywords:** DSMC, micro gas flows, micro-nozzle, generalized coordinates.

## Giriş

Yarı iletkenlerin üretim tekniklerinde yaşanan hızlı gelişmeler, üretiminde benzer tekniklerin kullanıldığı mikron boyutlu aparatların üretimini de önünü açmıştır. Son 25 senedir mikron boyutlarında mekanik parça üretim yeteneğimizin artmasına paralel olarak, bu yetenek kullanılarak üretilen aparatlar biyoloji, tıp, optik, havacılık ve uzay, elektronik gibi birçok alanda geniş bir kullanım yeri bulmuşlardır (Ho ve Tai, 1998). Ebatları 1mm. ile 1 mikron arasında değişen bu aparatlar MEMS (Mikro Elektrikli Mekanik Sistemler) olarak adlandırılmaktadırlar (Gad-el-Hak, 2001). MEMS aparatları basınç, sıcaklık, kütle akışı ve ses için duyurga olarak kullanılabilirdiği gibi, mikro-robot, mikro-ısı-makineleri, mikro-ısı-pompaları ve mikro-itki-sistemleri gibi karmaşık sistemlerden de oluşabilmektedirler. MEMS aparatları sadece mekanik ve elektronik aksamaları değil, aynı zamanda çeşitli akışkanları da içerirler. Mikro boyutlu akışkan özellikleri hakkındaki bilğimiz, bu boyuttaki mekanik aparatlar kadar fazla değildir.

Mikro ebatlı akışlarda, akışkan yüzey alanının akışkan hacmine olan oranı büyük oranda artar. Bu nedenle yüzey kuvvetleri hacimsel kuvvetlere nazaran baskın hale gelir ve akışkan beklenenden daha farklı özellikler göstermeye başlar. Deneylerden elde edilen neticeler bize ufak ebatlardaki akışkan özelliklerinin büyük ebattaki akışkanlardan farklılık arz ettiğini göstermektedir. Yapılan ölçümler göstermiştir ki uzun mikro-kanallarda gaz akışlarında basınç gradyenleri sabit olmamakta ve akı debisi klasik yöntemlerle tahmin edilenden daha fazla olmaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002). Yine buna ilaveten mikro ebatlı yataklarda yük kapasitesi azalmakta, mikro-motorlar ise beklenenden daha fazla akım çekmektedirler (Beskok, 2001). Mikro gaz akışları içeren cihazların doğru çalışabilmeleri için doğru sonuçlar veren akışkan çözümleme yöntemlerine ihtiyaç duyulmaktadır.

Gaz akışlarında gazın seyreltikliği boyutsuz Knudsen sayısı ( $Kn$ ) ile belirlenmektedir. Knudsen sayısı ortalama serbest yolun ( $\lambda$ ) akış geometrisinin karakteristik uzunluğuna ( $L$ ) olan oranını göstermektedir.

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1)$$

Mikro ebatlı gaz akışlarında genelde gazın yoğunluğu düşük olmasa bile karakteristik uzunluğun küçüklüğünden dolayı Knudsen sayısı yüksek olmaktadır. Mikro ebatlı gaz akışları genelde Knudsen sayısının  $0.01 < Kn < 10$  olduğu bölgede yer alırlar (Karniadakis ve Beskok, 2002). Knudsen sayısının yükselmesi ile seyreltikliği artan gazda molekül çarpışmalarının sayısı azalır.  $0.01 < Kn < 0.1$  bölgesi kayma hızlı akış bölgesi olup, yetersiz momentum ve enerji aktarımları nedeni ile gaz ve sınır arasında hız kayması ve sıcaklık atlaması oluşur. Bu bölgede sınır şartlarında gerekli düzeltmelerin yapılması koşulu ile Euler ve Navier-Stokes gibi geleneksel sürekli ortam denklemleri kullanılabilir.  $0.1 < Kn < 10$  bölgesi ise geçiş akış bölgesi olarak tanımlanmış olup, bu bölgede doğrusal bünye denklemleri içeren geleneksel sürekli ortam denklemleri doğru neticeler vermemektedir. Bu bölgede Burnett gibi yüksek mertebeden bünye denklemleri içeren sürekli ortam denklemleri veya DSMC gibi moleküler modeller kullanmak uygun olmaktadır.

Son zamanlarda yaşanan gelişmelere rağmen, içerdiği kararlılık problemleri ve sınır şartlarının fazlalığı nedeni ile Burnett denklemleri çözümleri son derece güç denklemlerdir. DSMC ise moleküler esaslı bir yöntem olup, geleneksel sürekli ortam denklemlerinin yetersiz kaldığı az yoğun gaz veya mikron boyutlarındaki seyreltik gaz akışlarının çözülmesinde kullanılmaktadır. Fakat Navier-Stokes ve Euler gibi geleneksel sürekli ortam denklemleri ile karşılaştırıldığında çözüm süresi açısından oldukça pahalı bir yöntemdir. DSMC yönteminde çözüm süresinin mümkün olduğunca kısaltılması için bazı önlemler alınmasına ihtiyaç duyulur. Bunu gerçekleştirmenin bir yolu gaz akış alanını ufak parçalara bölerek her bir ufak parçayı paralel çalışan farklı bir işlemcide çözerek toplam çözüm süresinin kısaltılmasıdır. İkinci önlem olarak ta her bir işlemcide çalışan DSMC programının bu hesaplamayı mümkün olduğunca kısa sürede tamamlamasına çalışmaktır. Mevcut DSMC çözücülerde, hareket eden moleküller

hücreden-hücreye takip edilerek bir zaman adımı sonunda gittikleri hücre saptanmakta ve takiben tüm DSMC molekülleri ayrı bir safhada hücre temelli olarak yeniden sıraya dizilmektedirler. Eğer moleküllerin bir zaman adımı sonunda gittiği son hücre bilgisi doğrudan bulunabilirse ve DSMC molekülleri karmaşık ve işlem zamanı uzun süren ayrı bir sıraya dizme işlemine gerek kalmadan sıralanabilirse hesaplama verimliliği oldukça artacaktır. Hücre bilgisini daha kısa sürede hesaplamanın bir yolu da 2-Boyutlu gaz akış alanı geometrisinin genelleştirilmiş koordinatlar kullanılarak kare bir geometriye dönüştürülmesidir. Bu aynı zaman da cebirsel yöntemle oluşturulmuş yapısal çözüm ağlarının da kare geometri üzerinde dikdörtgen çözüm ağlarına dönüşümü ile sonuçlanır. Bu çözüm ağları üzerine kurulu hücrelerin boyutları birbirine eşit olur. Dolayısı ile her iki koordinat sistemi arasındaki dönüşüm ilişkilerini kullanarak bir DSMC molekülünün son gittiği hücre daha kısa sürede hesaplanabilir. Yine yeni veri yapıları kullanılarak DSMC moleküllerini ayrı bir safhaya gerek kalmadan hareket safhası içinde hücre temelli olarak sıraya dizmek mümkün olmuştur.

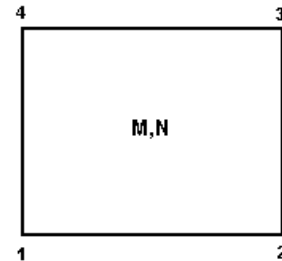
Aynı akış geometrisi ve sınır şartları kullanarak bir soğuk gaz akış problemi hücreden-hücreye takip yöntemi ve genelleştirilmiş koordinat sistemi kullanarak çözülmüş ve çözüm süreleri karşılaştırılarak yeni yöntemin daha kısa bir sürede netice verdiği saptanmıştır. Bu konu ile ilgili ayrıntılı bilgi aşağıda sunulmuştur.

### DSMC moleküllerini hücre temelinde sıraya dizme işleminin yeni veri yapısı ile yapılması

Gaz moleküllerinin çarpışmaları ve makro değerlerin hesaplanmaları için gaz akış alanında CFD (Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği) benzeri bir çözüm ağı oluşturulur. Matematiksel modellemelerde kullanılan bu çözüm ağları, fiziksel bir benzetim modeli olan DSMC yönteminde moleküllerin konumlarının ayrıklaştırıldığı hücreler olarak görev görmektedirler. Bu hücrelerin boyutları yerel ortalama serbest yol ile aynı mertebeden seçilir (Oran vd., 1998). Bu çalışmada hesaplama kolaylığı ve hızlı çözüm sağla-

dığı için gaz akış alanı gövdesine uydurulmuş dörtgen yapısal çözüm ağları kullanılmıştır. Her ne kadar bu tip çözüm ağları Wu ve diğerleri (2003)'ne göre probleme özgü bir nitelik taşıysalar da, alt bölgelerin kullanıldığı paralel çalışma mimarisinde bu sorunlar en aza indirilebilmektedirler.

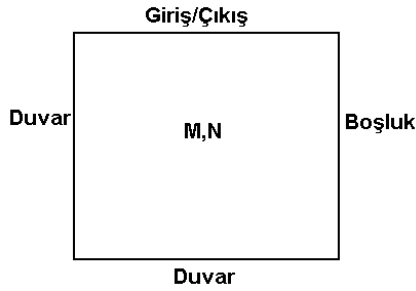
Gaz akış alanı bir ön-işlemci yazılımı kullanmak sureti ile gövdeye uydurulmuş yapısal çözüm ağları kullanılarak hücrelere bölünür. Bu amaçla cebirsel ağlama tekniği kullanılır (Fletcher, 1990). Önce her iki koordinat ekseninde oluşturulacak hücre sayıları hesaplanır. Akış alanı dış sınırlarına bu sayıya uygun miktarda ağ köşe noktası yerleştirilir. Üretilen ağlarda boyut değişiminin düzgün, hücre kenarlarının birbirine dik veya dike yakın ve kenar uzunluk oranlarının bire yakın olması istenir. Oluşturulan bu hücrelerin köşe noktaları Şekil 1'de gösterildiği üzere KOSE[M,N,K] veri yapısında muhafaza edilir. Bu veri yapısında M ve N 2-Boyutlu olarak hücre tanıtım bilgisini, K ise 4 köşeden birisini belirtir.



Şekil 1. Hücrenin köşe noktaları KOSE[M,N,K] veri yapısına kaydedilir

Bir diğer veri yapısı da KOSE[M,N,K] veri yapısından oluşturulan KENAR[M,N,P] veri yapısıdır. Bu veri yapısında Şekil 2'de görüleceği gibi hücre kenar uzunluk ve kenar özellik bilgileri tutulmaktadır. Burada yine M ve N hücreyi belirtirken, P hangi kenar olduğunu ifade eder. Duvar, boşluk, ara yüz ve giriş/çıkış olarak dört farklı tipte kenar kullanılmaktadır. Duvar tipi kenar ile gaz molekülleri arasındaki etkileşim yansıma şeklinde kendini göstermektedir. Moleküller boşluk tipi kenarlardan herhangi bir etkileşime girmeden geçerler. Ara yüz kenarlar sadece gaz akış alanının paralel çalışma için daha ufak alt bölgelere ayrıldığı durumlarda kulla-

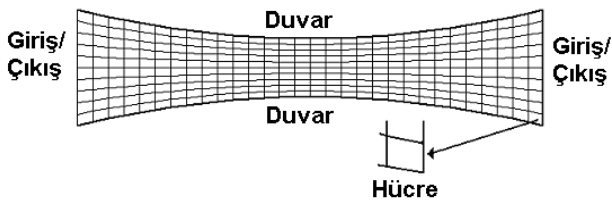
nılırlar. Bu kenarlardan geçen moleküller ara yüz kütüphaneleri kullanılarak içinden geçtikleri kenarın numarasını taşıyan alt bölgeye ait işlemciye aktarılırlar. Giriş/çıkış tipi kenarlar ise en karmaşık işlemleri gerektirirler. Moleküller hücreyi bu kenarlardan terk ederken sadece silinirler. Buna mukabil kenarın dışında mevcut ortamdan ise içeriye molekül ilavesi yapılır. İlave edilen moleküllerin sayısı ile konumları ve bu moleküllere ait hız bileşenleri için farklı yöntemler mevcuttur (Lilley ve Macrossan, 2003).



Şekil 2. Hücrenin kenar özellikleri  
KENAR[M,N,P] veri yapısına kaydedilir

DSMC yönteminde hesaplama süresini kısaltmak ve bilgisayar hafıza ihtiyacını makul bir seviyeye indirmek için temsilci moleküller kullanılmaktadır (Bird, 1994). Tek bir DSMC temsilci molekülü  $O_{FTM}$  kadar gerçek fiziksel molekülü temsil eder. Makro değerlere ait istatistiksel hataların makul bir seviyede tutmak için her hücrede ortalama olarak en az 20 DSMC temsilci molekülü kullanmak gerekmektedir (Oran vd., 1998).

Gaz akış alanı sınırları Şekil 3'te olduğu gibi yine hücre sınırlarında olduğu gibi duvar, ara yüz ve giriş/çıkış olarak işaretlenir. Sadece hücreler arasında kullanılan boşluk tipi kenar kullanılmamaktadır.



Şekil 3. Yakınsak-ıraksak lüle için gövdeye uyumlu yapısal çözüm ağlarından oluşturulan DSMC hücreleri ve akış alanı sınırları

Benzetimin başlangıcında her hücreye başlangıç koşullarına uyguna olarak bir sıcaklık, basınç, yoğunluk ve gaz akış hızı bileşen değeri atanır. İlâveten her hücrenin hacmi hesaplanır. Tüm bu bilgiler MAKRO[M,N] veri yapısında tutulurlar ve her bir zaman adımı sonunda güncellenirler. Benzetimin çalışmaya başlaması ile birlikte her bir hücreye MAKRO[M,N] veri yapısına uygun olarak DSMC molekülleri yerleştirilir.  $V_H$  hacmine sahip bir DSMC hücresinde yer alan DSMC temsilci molekül sayısı  $N_H$ , durum denklemi yardımı ile hesaplanır,

$$N_H = \frac{p}{k_B T} \frac{V_H}{O_{FTM}} \quad (2)$$

p: Basınç,  $k_B$ : Boltzmann sabiti, T: Sıcaklık

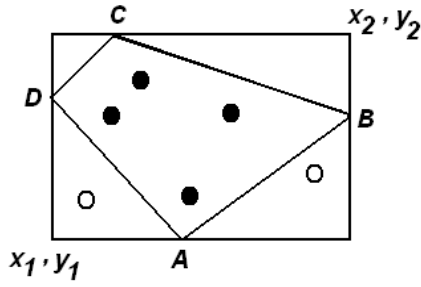
Hız bileşenleri ( $u, v, w$ ) ise Maxwell hız dağılımından hesaplanır.

$$\begin{aligned} u &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_f) \\ v &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_f) \\ w &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_f) \end{aligned} \quad (3)$$

$m$ : Molekül kütlesi,  $R_f$ : 0-1 arası rasgele sayı

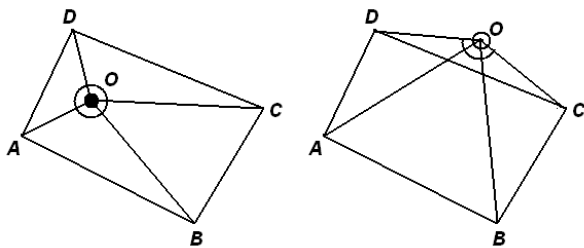
Konumları ise hücre içinde rasgele olacak şekildedir. Moleküllerin hücre içindeki konumlarının benzetim başlangıcında belirlenmesinde kullanılan yöntem aşağıda olduğu gibidir. Şekil 4'te olduğu gibi hücre önce en ufak ve en büyük x ve y değerlerinden oluşturulan bir dikdörtgenin içine alınır. Eğer bu dış dikdörtgen içine 2-Boyutlu olarak rasgele konumlandırılan molekül aynı zamanda hücre içinde de yer alıyorsa kabul edilir. Aksi durumda ret edilir. Döngüye gereken miktarda molekül konumlandırılana kadar devam edilir.

MOLEKUL[M,N,P] veri yapısı molekül hız bileşenlerini, molekül konum bilgisini ve gerek duyuluyorsa molekül iç enerji bilgisini de içerir. Bu veri yapısında M ve N her zaman olduğu gibi hücre bilgisini ifade ederken, P molekülün hücrede ki kaçıncı molekül olduğu bilgisini içerir.



Şekil 4. ABCD hücrelerini çevreleyen dikdörtgene yerleştirilen DSMC moleküllerinden sadece ABCD içinde de yer alan (içi siyah) moleküller kabul edilirler

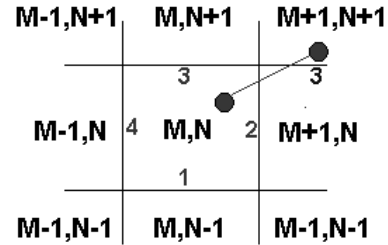
DSMC benzetiminde tüm hücelere DSMC molekülleri hız ve konum bilgilerini de içerecek şekilde atandıktan sonra, moleküller bir zaman adımı ( $\Delta t$ ) süresince ötelenirler. Bu zaman adımı moleküllerin birden fazla hücre değiştirmesini engelleyecek şekilde seçilir (Chen ve Boyd, 1996). Bu safhada DSMC molekülleri aynı hücrede kalabilir, farklı bir hücreye geçebilir, duvardan yansiyabilir veya akış alanını terk edebilir. Yapılacak ilk iş DSMC molekülünün aynı hücre içinde kalıp kalmadığını bulmaktır. Bunu anlamak için Şekil 5'te olduğu gibi molekülü hücre köşelerine birleştiren doğru parçaları arasında kalan açıların toplamı hesaplanır. Eğer bu açıların toplamı 360 dereceye eşit ise molekülün hücre içinde olduğu anlaşılır. Aksi durumda ise artık molekül o hücre içinde değildir.



Şekil 5. DSMC molekülünün ABCD hücre içinde olup olmadığının açı yöntemi ile test edilmesi

Eğer molekül hücre içinde bulunamazsa, ikinci işlem molekülün hücreyi hangi hücre kenarından terk ettiğini bulmaktır. Terk edilen kenarın özelliği molekül ve kenar arasındaki etkileşimi tayin eder. Molekül kenarın özelliğine bağlı olarak komşu hücreye geçebilir, yansiyabilir veya

akış alanı dışına çıktığı için silinebilir. Şekil 6'dan görüleceği üzere yapısal ağlama kullanıldığından dolayı kenar numarası aynı zamanda molekülün geçtiği hücre hakkında da bilgi verir. Tüm moleküller öteleme hareketlerinin sonuna kadar takip edilirler.



Şekil 6. DSMC molekülünün  $M,N$  hücrelerini 2 numaralı kenardan terk ederek önce  $M+1,N$  hücrelerine oradan da 3 numaralı kenardan geçerek  $M+1,N+1$  hücrelerine geçmesi

Tüm moleküller hareketlerini tamamladıkları vakit, mikro bilgiler YENIMOLEKUL[M,N,P] veri yapısında güncellenir. Güncel veri yapısı MOLEKUL[M,N,P] veri yapısı üzerine kopyalanarak güncelleme tamamlanır. Bu yeni yöntem sayesinde geleneksel DSMC yönteminde ihtiyaç duyulan karmaşık ve yavaş, molekülleri hücre sırasına dizme işlemine olan ihtiyaç ortadan kalkar. Hücre esaslı hesaplamalar Dietrich ve Boyd (1996); Kim ve diğerleri (2004) tarafından da önerilmiş, fakat yöntemin uygulama detayları hakkında bir bilgi verilmemiştir.

Moleküllerin hareketlerini tamamlamasından sonraki safha moleküllerin çarpışma safhasıdır. Bu safhada aynı hücrede de yer alan moleküller kinetik teori uyarınca çarpışma işlemine tabi tutulurlar. Momentum ve enerjinin korunduğu ikili çarpışmalar neticesinde çarpışan moleküllerin sadece hızları değişir. Konumlarında bir değişiklik olmaz. Bu çalışmada Değişken Katı Küre (VHS) çarpışma modeli ve Zaman Savaşsız (NTC) şeması kullanılmıştır (Bird, 1994).

Son safha ise mikro değerlerden makro değerlerin hesaplanmasıdır. Makro değerler molekül sayı yoğunluğundan ve molekül hız bileşenlerinin ortalamalarından hesaplanır. Bu bilgiler aynı zamanda sınır koşullarının güncellenmesinde de kullanılmaktadır.

## DSMC moleküllerinin 2-Boyutlu geliştirilmiş koordinat sistemleri kullanılarak takibi

Kartezyen koordinat sistemi ile tanımlanan 2-Boyutlu kapalı bölgeleri geliştirilmiş koordinat sistemlerine taşıyarak boyutsuz kenarları 0 ile 1 arasında değişen kare şeklinde bölgelere dönüştürmek mümkündür. Bu dönüşüm esnasında yapısal çözüm ağları da kare bölge içine taşınırlar. Kare bölge içine yerleşen yapısal ağlar eşit boyutlu düzgün dikdörtgen hücrelerden oluşursa temsilci moleküllerin içinde yer aldığı hücre bilgisi daha kısa zamanda elde edilir. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiğinde (CFD) geliştirilmiş koordinatlar sıkça başvurulanan bir yöntemdir. Bu teknik kullanılarak fiziksel gaz akış alanı, Euler ve Navier-Stokes gibi diferansiyel denklemlerin daha kolay çözülebildiği bir hesaplama bölgesine dönüştürülür (Fletcher, 1990). Geliştirilmiş koordinat sistemi Wishart (2006) tarafından DSMC yönteminde moleküllerin belli bir hücre içindeki konumlarını saptamak için kullanılmıştır. Bu çalışmada ise farklı olarak moleküllerin gaz akış alanı içinde hangi hücrede konumlandığı bulunmaktadır.

Fiziksel gaz akış bölgesinde moleküller ilk konumlarından  $(x_1, y_1)$  başlayarak üzerlerindeki hız  $(u_1, v_1)$  uyarınca hareket ederler.  $\Delta t$  zaman adımı sonunda moleküller öteleme hareketlerini tamamlarlar  $(x_2, y_2)$ .

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + u_1 \cdot \Delta t \\ y_2 &= y_1 + v_1 \cdot \Delta t \end{aligned} \quad (4)$$

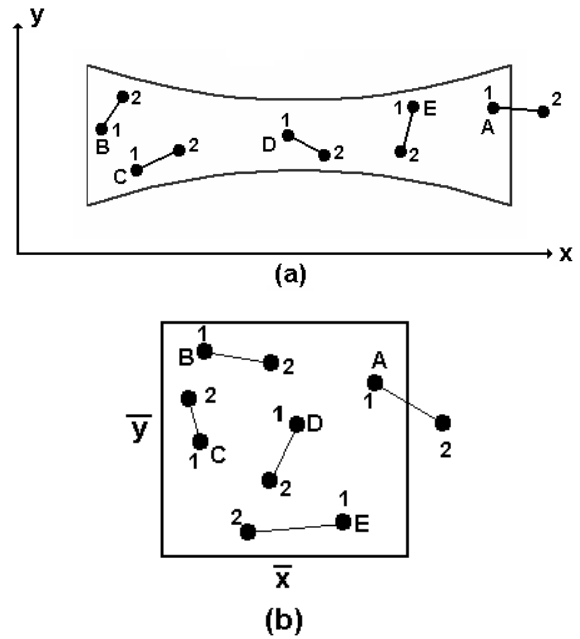
Bu esnada bazı DSMC molekülleri giriş/çıkış kenarından gaz akış alanını terk ederken, yeni DSMC molekülleri de gaz akış alanına ilave edilirler. Geliştirilmiş koordinat sistemi kullanıldığı zaman, moleküllerin hücreden-hücreye takibi yerine, moleküllerin son gittiği konum her  $\Delta t$  zaman adımı sonunda koordinat değişimi ile hesaplama bölgesinde de hesaplanır.

$$\begin{aligned} \bar{x}_2 &= \bar{x}_2(x_2, y_2) \\ \bar{y}_2 &= \bar{y}_2(x_2, y_2) \end{aligned} \quad (5)$$

Hesaplanan yeni konumlar yeni koordinat sisteminde kontrol edilir ve gaz akış bölgesini terk edip etmedikleri kontrol edilir. Eğer molekülün gaz akış bölgesini terk etmediği anlaşılırsa,  $x$  eksen ve  $y$  eksen boyunca kullanılan hücre sayıları  $(CM, CN)$  bilgisinden yararlanarak yeni molekül hücre bilgisi  $(M, N)$  aşağıdaki gibi kolayca hesaplanır.

$$\begin{aligned} M &= \bar{x}_2 \cdot CM + 1 \\ N &= \bar{y}_2 \cdot CN + 1 \end{aligned} \quad (6)$$

Eğer DSMC molekülünün gaz akış bölgesi içinde olmadığı anlaşılırsa, önce hangi kenardan bölgeyi terk ettiği bulunarak, o kenarın özelliğine göre molekül ve kenar arasında gereken etkileşim hesaplanır. Şekil 7'de olduğu gibi eğer kenar bir duvar ise molekül yansımaya tabi tutulur. Bu yansıma işlemi fiziksel bölgede yapılır. Kenar giriş/çıkış sınırı özelliği taşıyor ise molekül sadece silinir. Kenar ara yüz sınırı ise molekül gittiği alt bölgenin işlemcisine aktarılır.



Şekil 7. DSMC moleküllerinin hareketi  
(a) Fiziksel bölgede (b) Hesaplama bölgesinde

2-Boyutlu mik Moleküllerin gittiği son hücrenin hesaplanmasını takiben aynı hücreden-hücreye takip yönteminde olduğu gibi moleküller için oluşturulan yeni veri yapısı, eski veri yapısının

üzerine kopya edilir. Bu yöntemde görüldüğü üzere moleküllerin hareketleri, çarpışmaları ve makro değerlerin hesaplanmaları tamamen fiziksel gaz akış bölgesinin tanımlandığı koordinat sisteminde yapılırken, sadece molekül hücre bilgisinin hesaplanması için hesaplama bölgesini oluşturduğumuz genelleştirilmiş koordinat sistemi kullanılmaktadır.

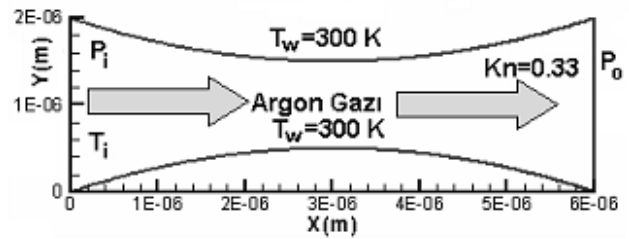
### Mikro-lülede Argon gaz akış problemi

Literatürden Wu ve diğerleri (2001)'ne ait bir test problemi seçilerek, molekül hücre bilgisinin hem hücre-hücre takibi ile, hem de genelleştirilmiş koordinat sistemi ile tespit edildiği iki farklı yöntem birbirleri ile karşılaştırıldı. Her iki yöntemde de aynı problem, aynı sayıda DSMC molekülü, hücre sayısı (12150) ve zaman adımı sayısı (5000) kullanılarak çözümlenmekle birlikte, toplam çözüm süresinin farklı olduğu saptandı. Şekil 8'de belirtilen bu test probleminde basınç farkından dolayı mikro-lülede akan Argon gazı analiz edilir. Gazın giriş ve çıkış basınçları 80400 Pa ve 5387 Pa olarak alınmıştır. Gazın mikro-lüle giriş sıcaklığı 300 K'dir. Mikro-lüle duvar sıcaklıkları yine 300 K'dir. Eksik sınır koşulları akış bölgesinden tamamlanır. Mikro-lüle çıkış bölgesinde Knudsen sayısı 0.33 olarak hesaplanmıştır. Problemden basınç sınır koşulları uygulanır.

Önce her iki koordinat sistemi arasındaki dönüşüm denklemleri bulunur. Bu dönüşüm bilgilerinden yararlanarak fiziksel bölge ve buna ait yapısal ağ sistemi, kare şeklinde hesaplama bölgesine dönüştürülür. Dönüşüm denklemleri ve kenarlara ait denklemler aşağıda verilmiş olup mikro-lüle kenar denklemlerine ait katsayılar ise  $a_U = (18 \times 10^{-6})^{-1}$ ,  $b_U = -(3)^{-1}$ ,  $c_U = 2 \times 10^{-6}$ ,  $a_D = -(18 \times 10^{-6})^{-1}$ ,  $b_D = (3)^{-1}$ ,  $c_D = 0$  olarak belirlenmiştir.

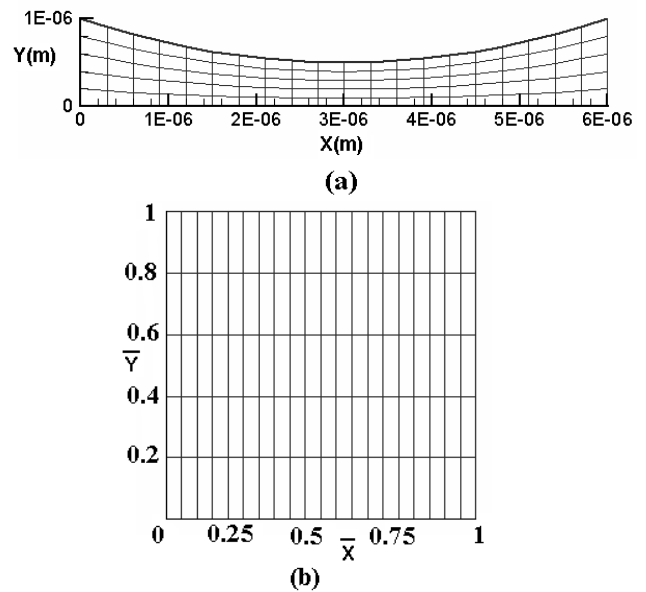
$$\begin{aligned} \bar{x} &= (x - x_L) / (x_R - x_L) \\ \bar{y} &= (y - y_D) / (y_U - y_D) \\ x_R &= x_R(y) = 6 \times 10^{-6} \text{ m} \\ x_L &= x_L(y) = 0 \\ y_U &= y_U(x) = a_U x^2 + b_U x + c_U \\ y_D &= y_D(x) = a_D x^2 + b_D x + c_D \end{aligned} \quad (7)$$

Hesaplama zamanını akış geometrisinin simetri özelliğinden yararlanarak daha da kısaltmak için, lülenin tam ortasından kanal boyunca geçen hat simetri eksenini olarak belirlenir ve fiziksel akış alanı bu hat boyunca iki eşit parçaya bölünerek hesaplamasının sadece bir bölgede yapılması sağlanır. Simetri hattı DSMC yönteminde molekülleri düzgün yansıtan bir duvar olarak belirlenmiştir. Buna mukabil hesaplama bölgesi yine dikdörtgen şeklinde hücrelerden oluşan ve ebatları 0 ile 1 arasında değişen boyutsuz bir karedir. Yeni oluşan fiziksel akış bölgesi için üst duvarda değişen katsayı  $c_U = 10^{-6}$  olurken, alt duvar için  $y_D = 0$  olarak hesaplanır.



Şekil 8. Mikro-lülede Argon gazı akışı

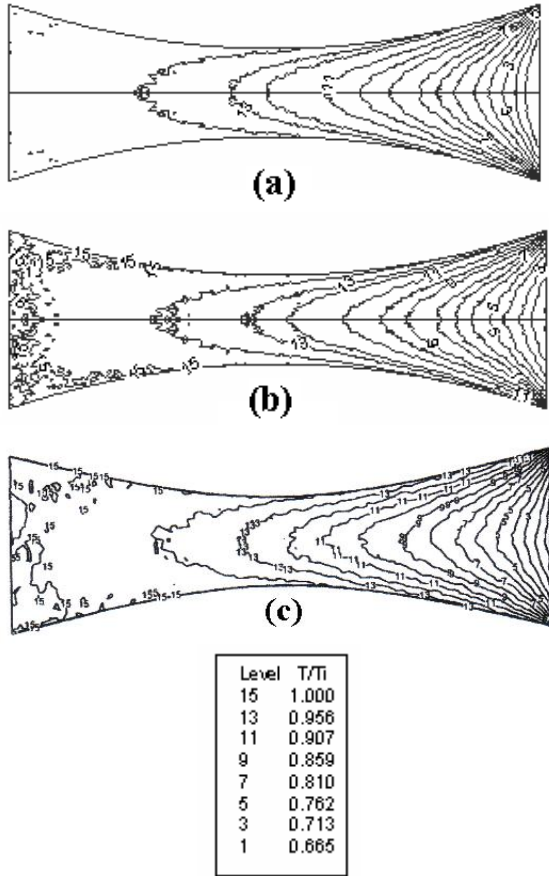
Bu dönüşüm denklemleri kullanılarak yapılan koordinat sistemi dönüşümü Şekil 9'da gösterilmiştir.



Şekil 9. Yakınsak-ırsak mikro-lüle üst yarısı  
(a) Fiziksel bölge (b) Koordinat dönüşümü ile elde edilen hesaplama bölgesi



Neticeler göstermektedir ki genelleştirilmiş koordinat sistemleri kullanılarak molekül hücre bilgisinin elde edildiği yöntem, bu bilginin hücre-hücre takip edilerek elde edildiği yöntemle nazaran yaklaşık yarı yarıya daha kısa sürede netice vermektedir. Mikro-lüle için hesaplanan sıcaklık değerleri ve hesaplama süreleri Şekil 10 ve Tablo 1’de verilmiştir.



Şekil 10. Mikro-lüle sıcaklık eş çizgileri  
(a) Hücreden-hücreye yöntemi (b) Koordinat dönüşümü yöntemi (c) Wu ve diğerleri (2003) çalışması

Tablo 1. Mikro-lüle gaz akışı için farklı yöntemlerle elde edilen çözüm süreleri

Akış parametreleri	DSMC molekül sayısı	Toplam çözüm süresi (dakika)
Hücreden-hücreye takip yöntemi	~1 434 000	1 321
Genelleştirilmiş koordinat yöntemi	~1 434 000	684

## Değerlendirme

DSMC seyreltik gaz akışlarını çözümlemek için kullanılan molekül bir yöntemdir. Diğer tüm molekül yöntemler gibi hesaplama yükü açısından oldukça pahalıdır. Bu çalışmada hesaplama verimliliğini arttırmak için iki farklı yaklaşımda bulunulmuştur.

İlk olarak geleneksel DSMC yönteminde moleküllerin hareket safhasının sonunda ayrı bir safhada gerçekleştirilen moleküllerin hücre temelli olarak sıraya dizilmesi işlemine olan ihtiyaca son verilmiştir. Bu amaçla yeni veri yapıları kullanılmış ve sıraya dizilme işlemi hareket safhası içinde tamamlanmıştır.

İkinci olarak moleküllerin hücre bilgisini hesaplamak için genelleştirilmiş koordinatlardan faydalanılmıştır. Bu çalışmada fiziksel gaz akış alanı koordinat dönüşümü ile hesaplama bölgesine dönüştürülmüş ve DSMC molekül hücre bilgilerinin daha kısa sürede hesaplanabileceği görülmüştür. Burada gözden kaçmaması gereken en önemli nokta tüm molekül hareket, çarpışma ve örnekleme safhalarının tamamen fiziksel bölgede gerçekleştirilmesine karşın hesaplama bölgesinin sadece molekül hücre bilgisini hesaplamak için kullanılmasıdır. Literatürden seçilen bir mikro-lüle Argon gaz akış problemi hem hücreden-hücreye takip yöntemi hem de koordinat transformasyonu yöntemi kullanılarak çözülmüştür. Elde edilen neticeler sonucunda yeni yöntemin yaklaşık iki kat daha hızlı çalıştığı görülmüştür.

## Kaynaklar

- Beskok, A., (2001). *Molecular based Microfluidic simulation models in MEMS Handbook*, Chapter 8, Gad-el-Hak, M., eds, CRC Press, Boca Raton, Florida.
- Bird, G.A., (1994). *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Clarendon Press, Oxford.
- Chen, G. ve Boyd, I.D., (1996). Statistical error analysis for the direct simulation Monte Carlo method, *Journal of Computational Physics*, **126**, 434-448.
- Dietrich, S., ve Boyd, I.D., (1996). Scalar and parallel optimized implementation of the direct simu-

- lation Monte Carlo method, *Journal of Computational Physics*, **126**, 328-342.
- Fletcher, C.A.J., (1990). *Computational techniques for fluid dynamics 2*, Springer-Verlag, Sydney.
- Gad-el-Hak, M., (2001). Flow physics in MEMS, *Mecanique and Industries*, **2**, 313-341.
- Ho, C.M. ve Tai, Y.C., (1998). Micro-electro-mechanical-systems (MEMS) and fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **30**, 579-612.
- Karniadakis, G.E. ve Beskok, A., (2002). *Micro flows fundamentals and simulation*, Springer-Verlag, New York.
- Kim, M.G., Kim, H.S. ve Kwon, O.J., (2004). A parallel cell-based DSMC method on unstructured adaptive meshes, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **44**, 1317-1335.
- Lilley, C.R. ve Macrossan, M.N., (2003). Methods for implementing the stream boundary condition in DSMC computations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **42**, 1363-1371.
- Oran, E.S., Oh, C.K. ve Cybyk, B.Z., (1998). Direct simulation Monte Carlo: Recent advances and applications, *Annual Review Fluid Mechanics*, **30**, 403-441.
- Shen, C., (2005), *Rarefied gas dynamics-fundamentals, simulations and micro flows*, Springer-Verlag, Berlin.
- Wishart, S.J., (2004). A parallel solution adaptive implementation of the direct simulation Monte Carlo, *PhD Thesis*, The University of Sydney, Department of the Aerospace, Mechatronic and Mechanical Engineering.
- Wu, J.S. ve Tseng, K.C., (2001). Analysis of internal micro scale gas flows with pressure boundaries using DSMC method, *Computers&Fluids*, **30**, 711-735.
- Wu, J.S., Tseng, K.C. ve Yang, T.J., (2003). Parallel implementation of DSMC using unstructured mesh, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **17**, 5, 405-422.